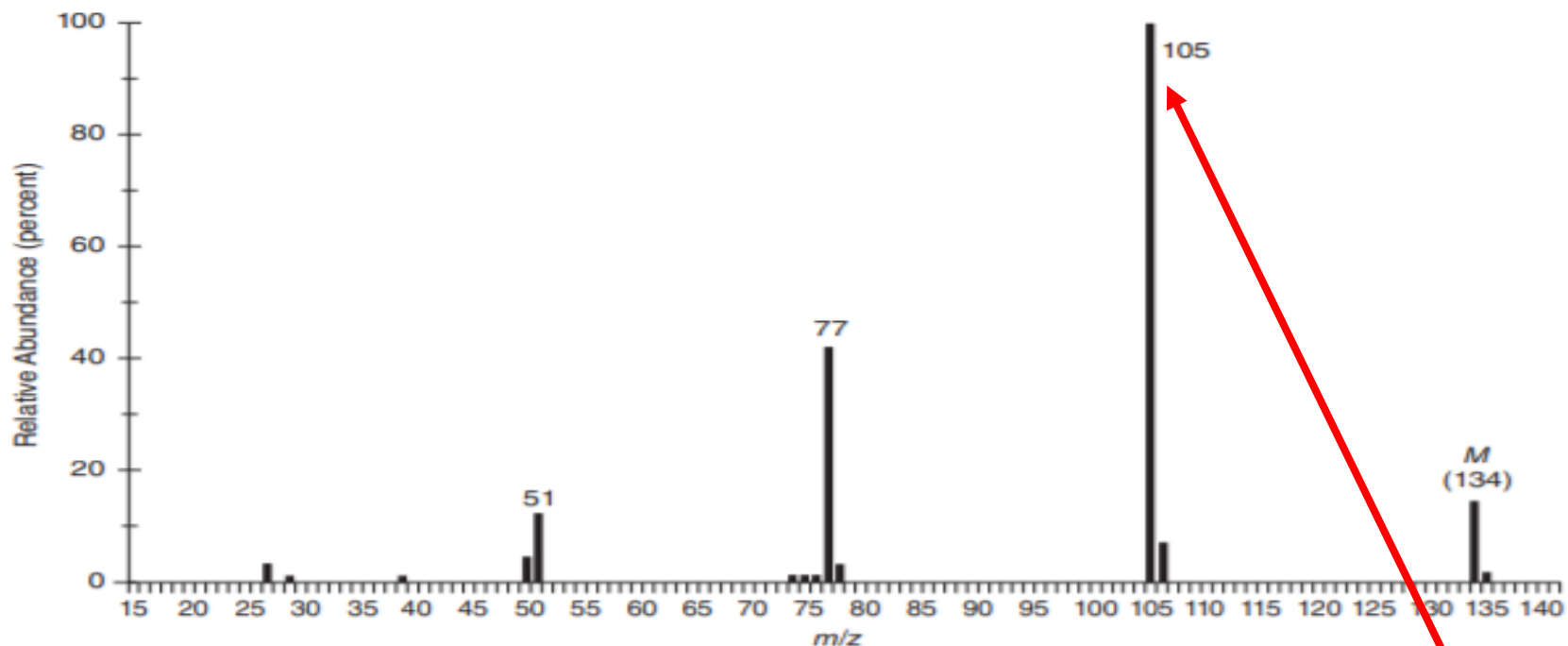


Διαίρεση ΜΒ δια 13 (CH)=n, Υπόλοιπο=x → Μ.Τ. C<sub>n</sub>H<sub>m</sub> m=n+x

## Rule of Thirteen

- **Example:** The formula for a hydrocarbon with M<sup>+</sup> = 106 can be found:
  - **Step 1:** n = 106/13 = 8 (R = 2)
  - **Step 2:** m = 8 + 2 = 10
  - **Formula:** C<sub>8</sub>H<sub>10</sub>
- If a heteroatom is present,
  - Subtract the mass of each heteroatom from the MW
  - Calculate the formula for the corresponding hydrocarbon
  - Add the heteroatoms to the formula

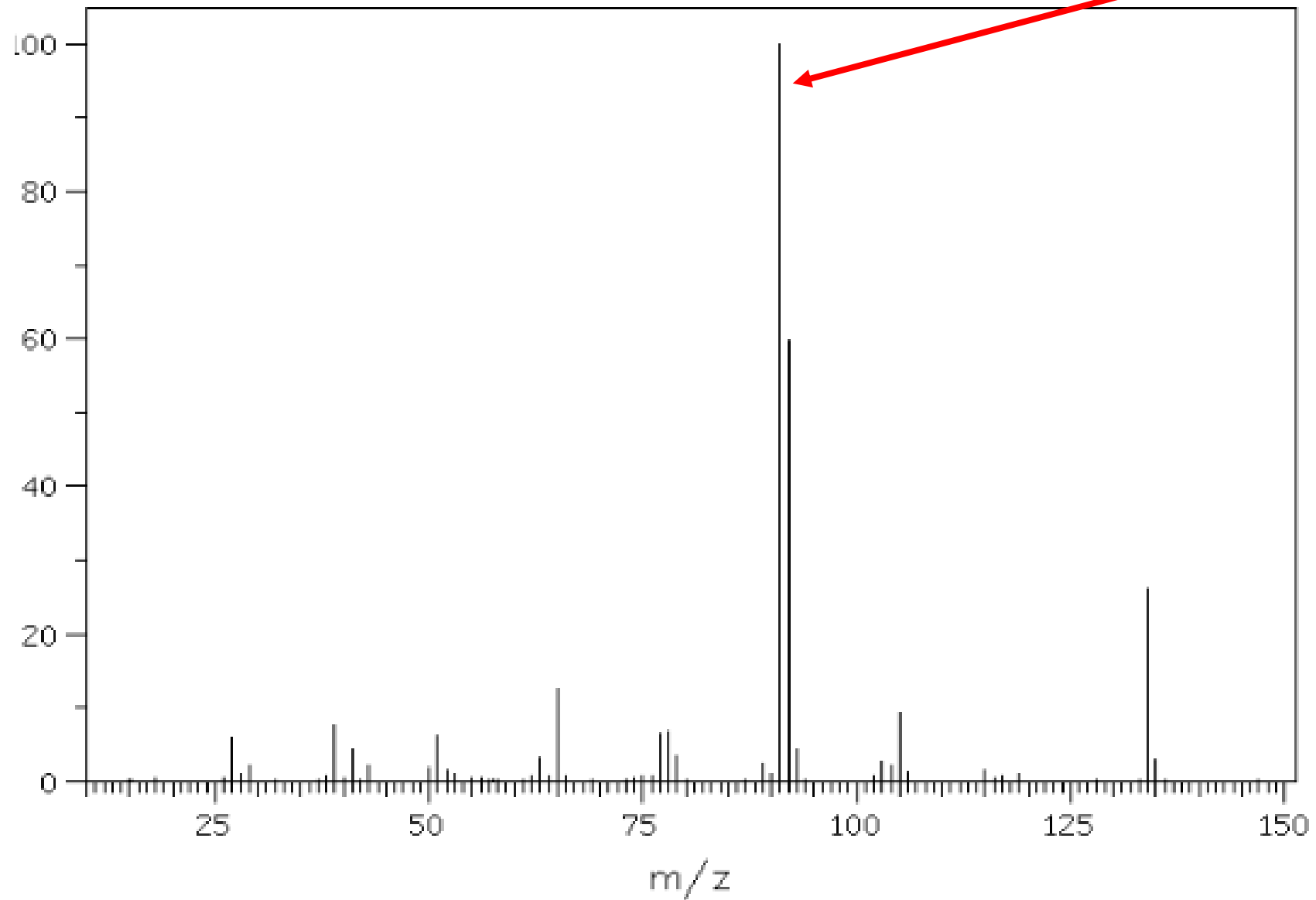
**ΑΣΚΗΣΗ 1.** Μια άγνωστη ένωση έχει το παρακάτω φάσμα MS. Ποια είναι αυτή η ένωση;



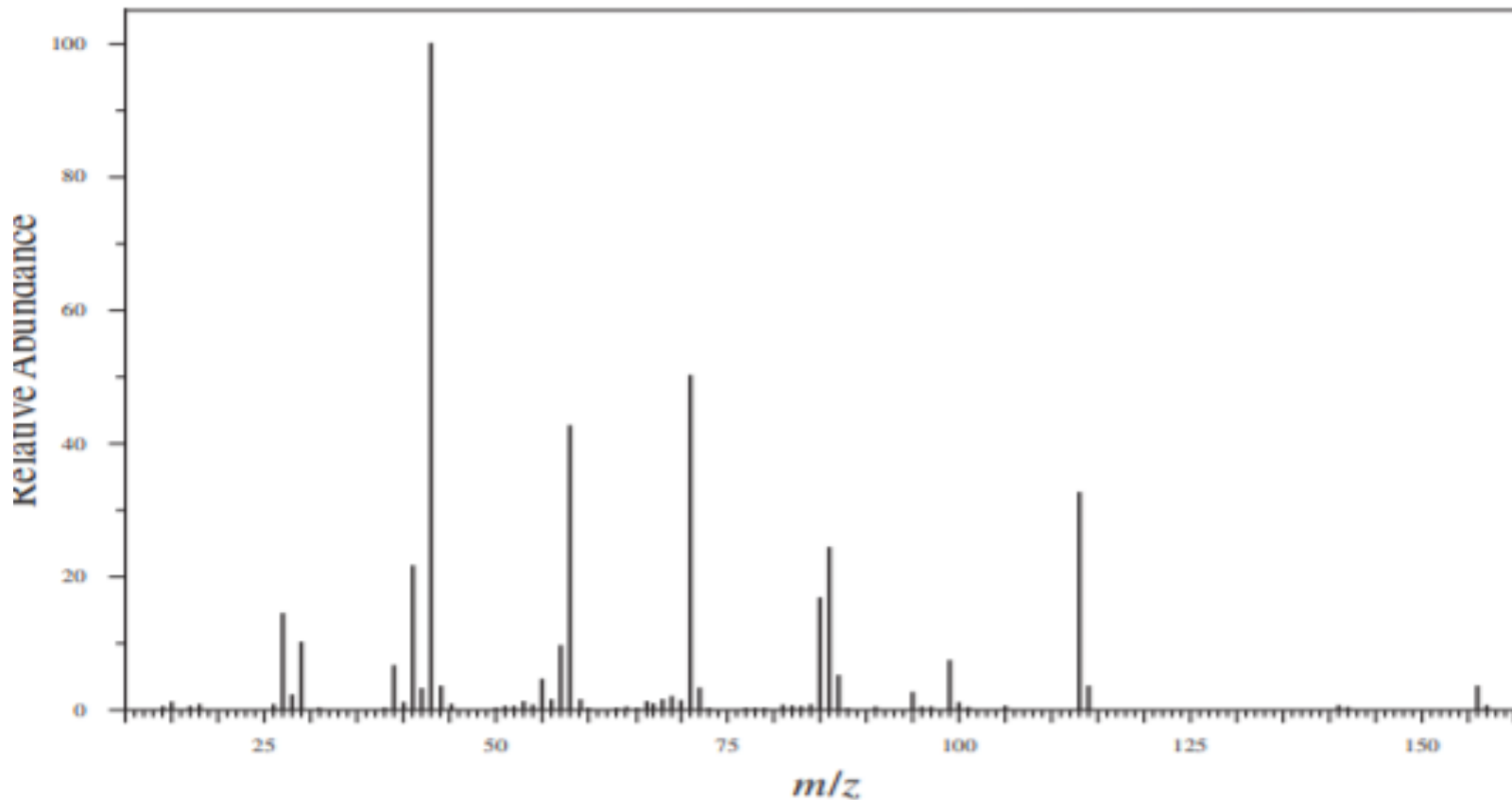
Το  $M^+$  είναι 134. Με βάση τον κανόνα του 13:  $134/13=10$  υπόλοιπο 4. Άρα Μ.Τ.  $C_{10}H_{14}$  και Ισοδύναμο Διπλού Δεσμού 4. Αν υπάρχει ένα O, τότε  $134-16=118$  και  $118/13=9$  και υπόλοιπο 1. Άρα Μ.Τ.  $C_9H_{10}O$ .

Η βασική κορυφή 105 και τα ιόντα 77 και 51 δείχνουν σαν πιθανό για το 105 το  $PhCO^+$ . Η διαφορά  $134-105=29$  δείχνει την παρουσία Et-ομάδας. Δηλαδή  $PhCOEt$  με βάση τον 2° Μ.Τ.

Η ένωση  $\text{PhCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$  με Μ.Τ.  $\text{C}_{10}\text{H}_{14}$  δίνει το παρακάτω φάσμα MS με βασική κορυφή στο  $m/z$  91 για  $\text{PhCH}_2^+$ .



Μια δεκανόνη έχει το παρακάτω φάσμα. Ποια ισομερής δεκανόνη είναι;



Οι κετόνες δίνουν συνήθως  $\alpha$ -σχάση και μετάθεση McLafferty. Οπότε τα πιθανά ισομερή θα έδιναν:

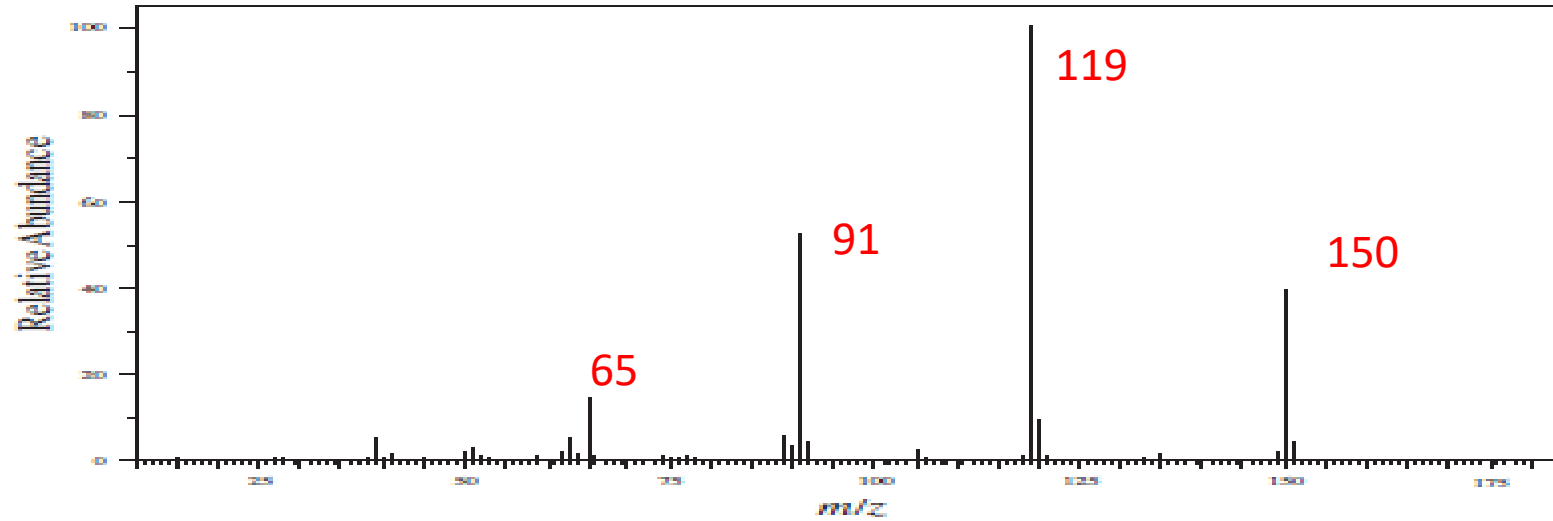
Decanone isomer	$\alpha$ -cleavage fragments ( $m/z$ )	McLafferty fragments ( $m/z$ )
2-decanone	43 and <u>141</u>	<u>58</u>
3-decanone	57 and <u>127</u>	<u>72</u>
4-decanone	71 and 113	<u>128</u> and <u>86</u>
5-decanone	85 and 99	<u>100</u> and <u>114</u>

Δεν υπάρχουν  
ή είναι ελάχιστα

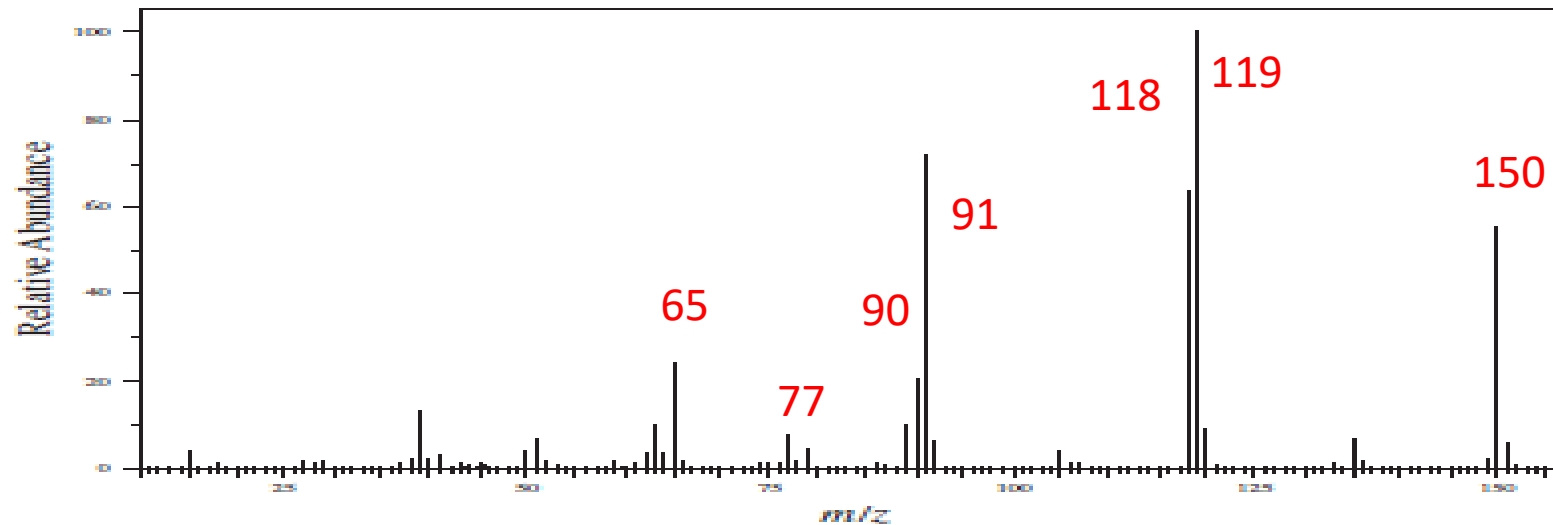
Άρα η ένωση είναι η 4-δεκανόνη.

Τα φάσματα EI MS του 2-μεθυλοβενζοϊκού μεθυλεστέρα και 3-μεθυλοβενζοϊκού μεθυλεστέρα δίνονται παρακάτω. Προσδιορίστε σε ποιο αντιστοιχεί το καθένα.

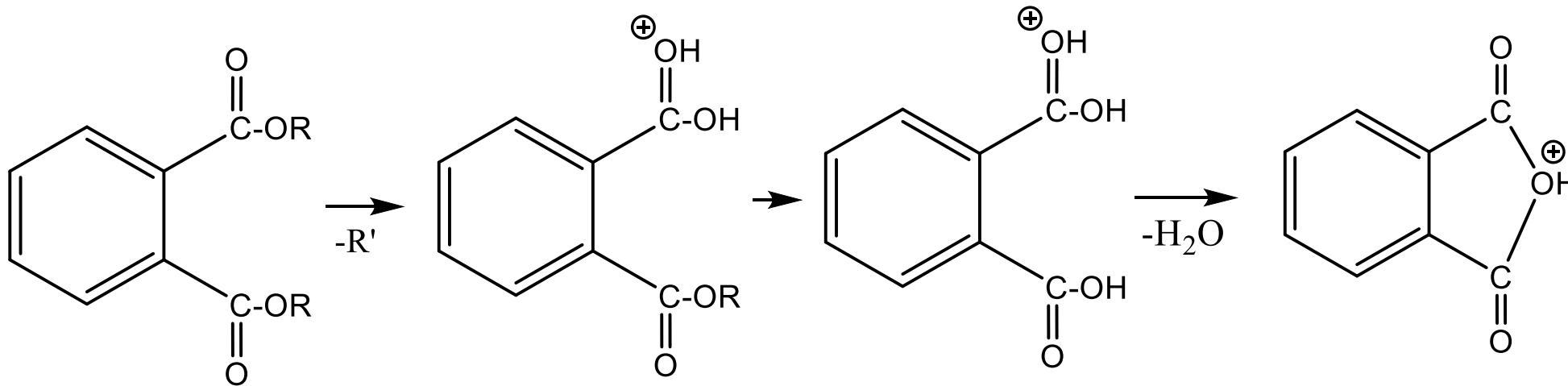
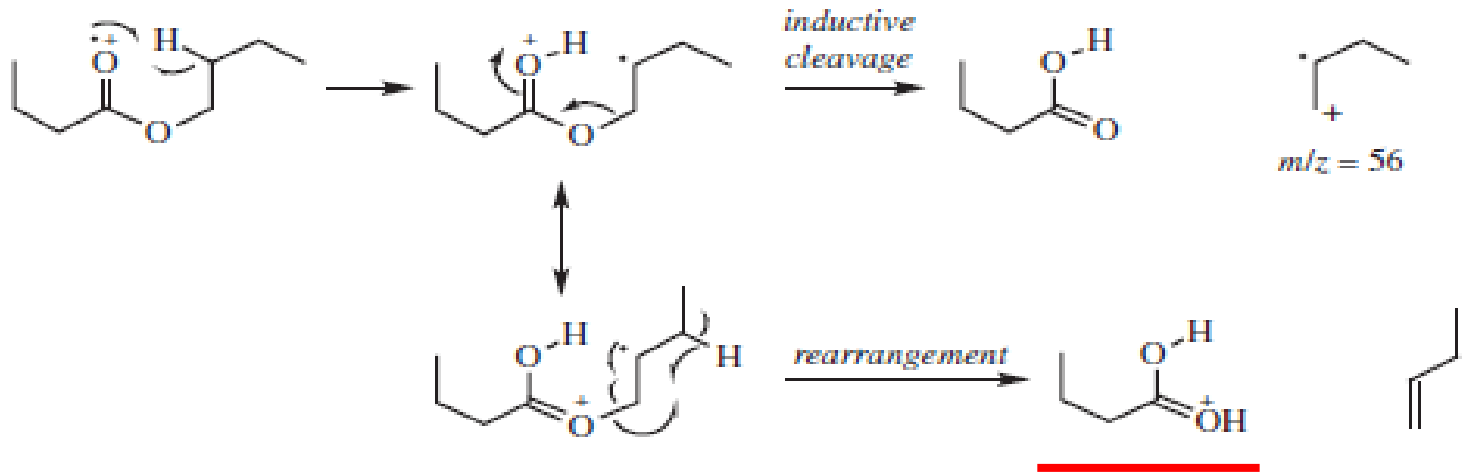
Spectrum 1



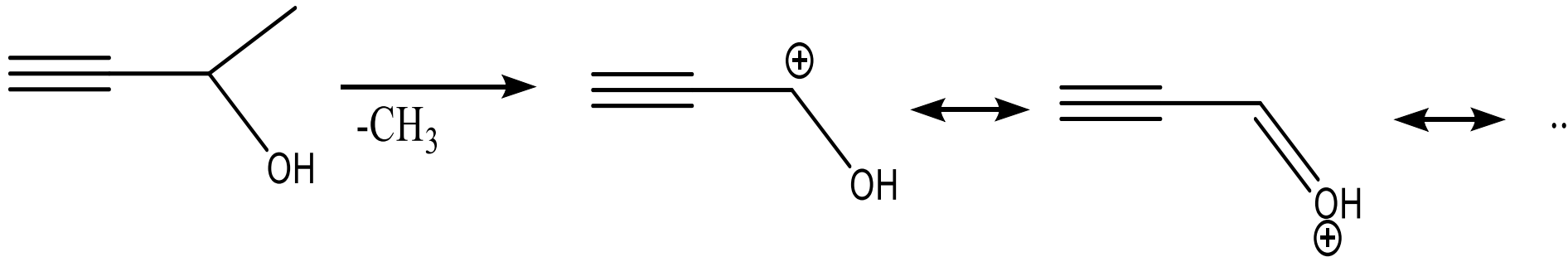
Spectrum 2



Οι φθαλικοί εστέρες χρησιμοποιούνται σαν πλαστικοποιητές. Έτσι μπορούν να δώσουν κάποια πρόσμειξη από τις αντλίες διάχυσης που έχουν λάδι. Το χαρακτηριστικό τους είναι ένα θραύσμα σε  $m/z$  149. Εξηγήστε αυτό το ιόν.



Το φάσμα MS της βου-3-υν-2-όλης δίνει ένα μεγάλο θραύσμα σε  $m/z = 55$ . Σχεδιάστε τη δομή του και εξηγήστε τη σταθερότητά του.



Ποια θα είναι η βασική κορυφή για τη πεντανόλη-2 και την ισομερή της 2-μεθυλοβουτανόλη-2;

Πώς θα διακρίνετε με τα φάσματα MS τα ισομερή οξικό βενζυλεστέρα και βενζοϊκό αιθυλεστέρα;

Πώς θα διακρίνετε με τα φάσματα MS τα ισομερή 2-μεθυλο βενζοϊκό οξύ και 4-μεθυλοβενζοϊκό οξύ;



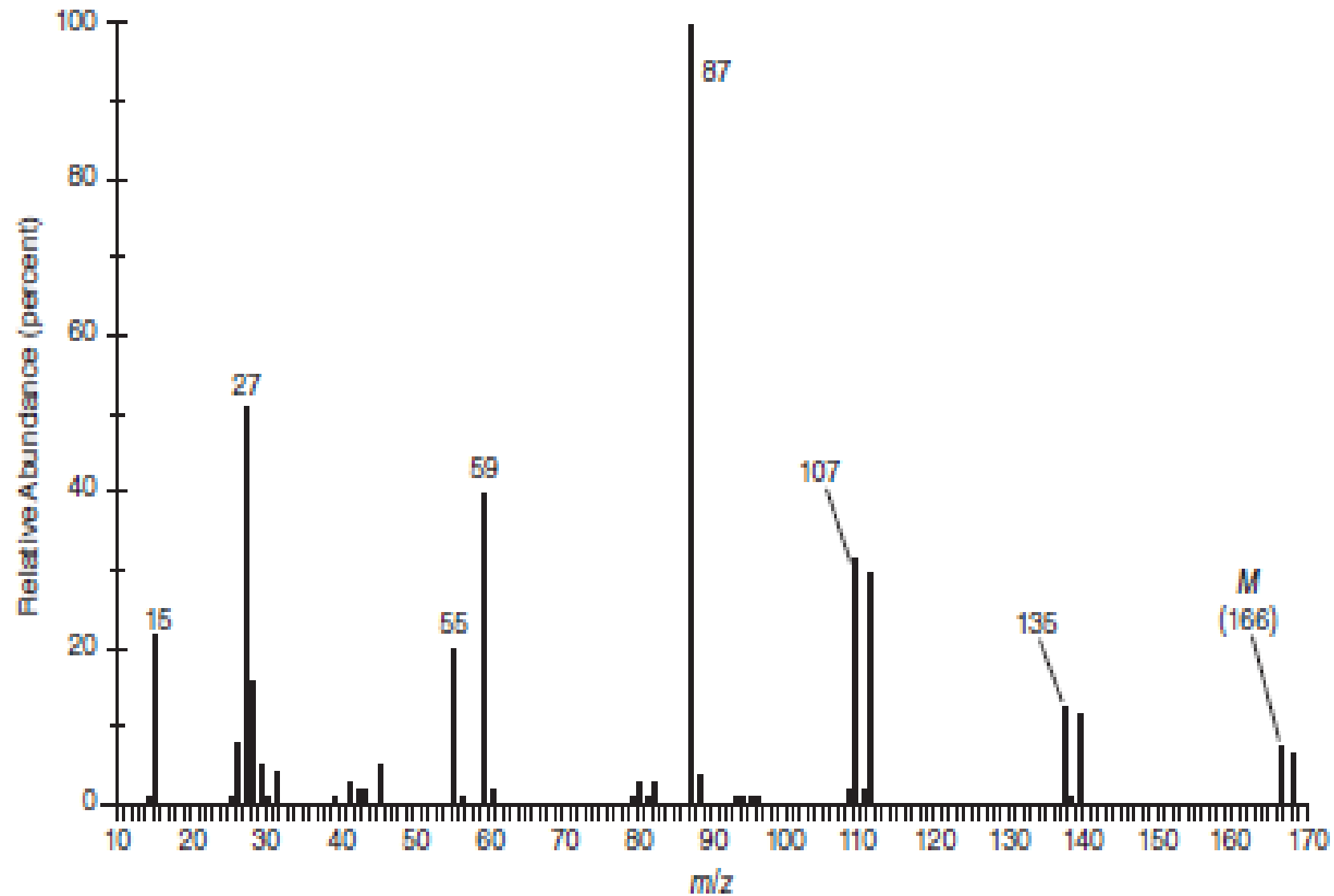
Πώς θα διακρίνετε με τα φάσματα MS τα ισομερή προπιοφαινόνη και 2-φαινυλακετόνη;

Πώς θα διακρίνετε με τα φάσματα MS τα ισομερή βουταναμίνη και N-μεθυλοπροπαναμίνη;

Πώς θα διακρίνετε με τα φάσματα MS τα ισομερή  $\text{PhC}(\text{CH}_3)_3$  και  $\text{PhCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$ ;

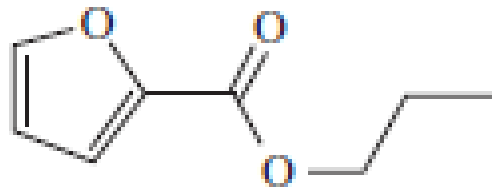
Πώς θα διακρίνετε με τα φάσματα MS τα ισομερή 3-μεθυλοπενταν-2-όνη και 4-μεθυλοπενταν-2-όνη;

Μια ένωση με Μ.Τ.  $C_4H_7BrO_2$  Δίνει το επόμενο φάσμα MS . Ποια ένωση είναι;

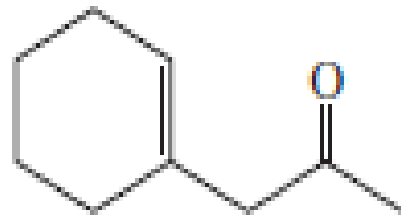


Εξηγείστε τα θραύσματα για τις αντίστοιχες ενώσεις:

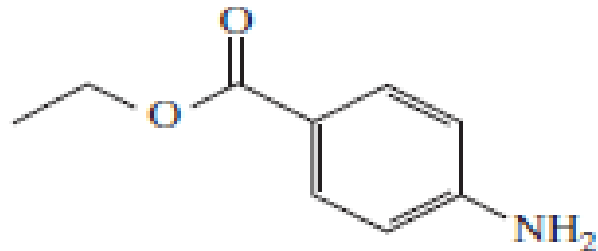
Fragment ion at  $m/z = 95$  (base peak in spectrum)



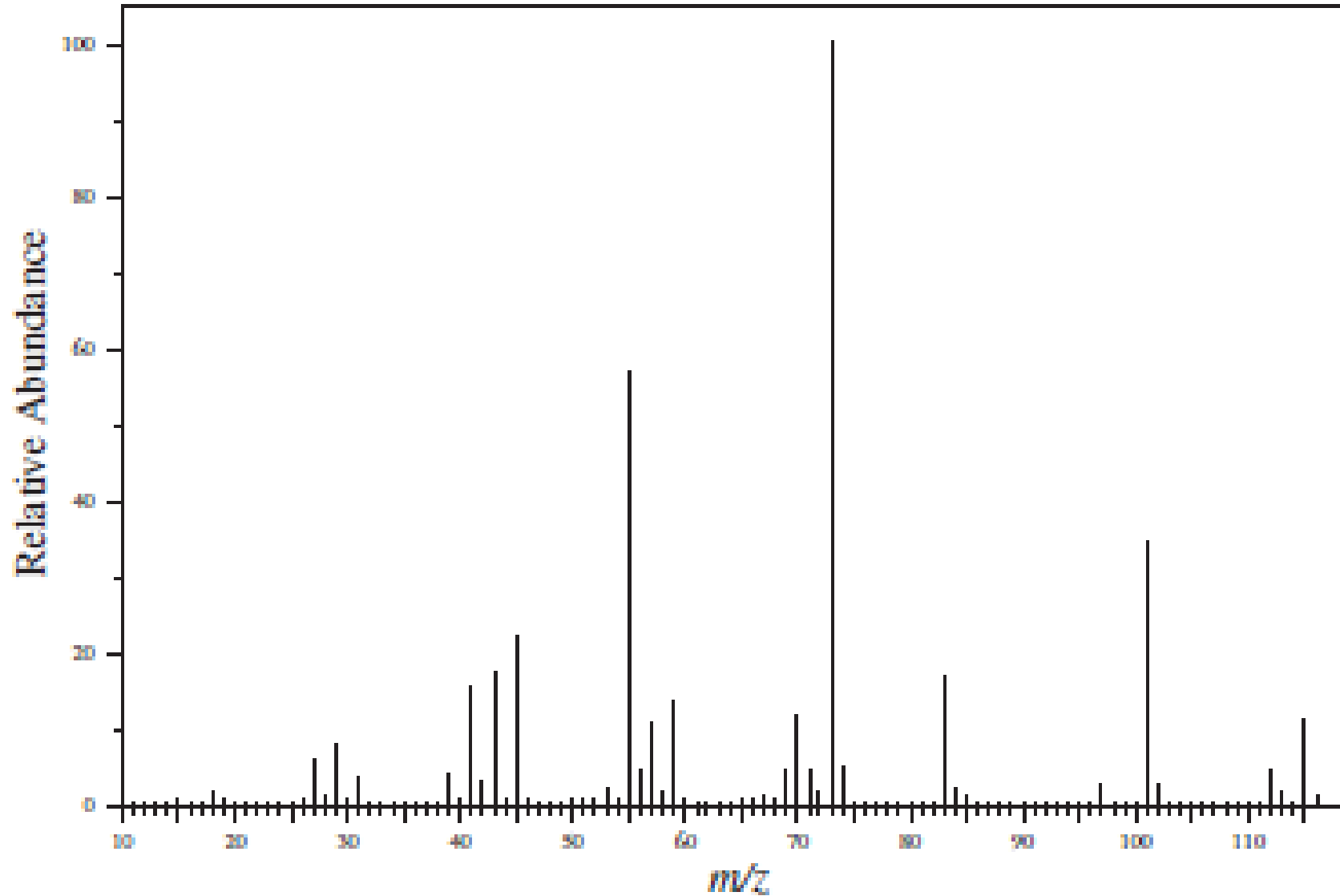
Fragment ions at  $m/z = 95$  (base peak) and 43



Fragment ion at  $m/z = 120$  (base peak)

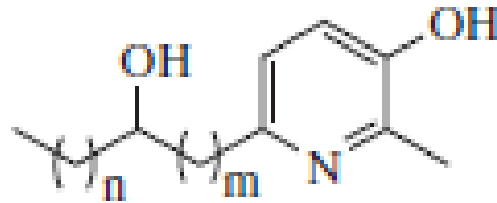


Εξηγείστε τα σημαντικά θραύσματα για το παρακάτω φάσμα MS της 3-μεθυλο-3-επτανόλης.



Δύο ισομερείς ενώσεις που απομονώθηκαν από το βραζιλιάνικο δέντρο *Senna multijuga* έχουν τον παρακάτω τύπο και τα αντίστοιχα φάσματα MS.

- α) Να βρεθεί η θέση του OH στα δύο ισομερή.
- β) Να εξηγηθεί ο σχηματισμός της βασικής κορυφής.



$$n + m = 10$$

Isomer A: EI-MS,  $m/z$  (rel. int.): 222(20), 150(10), 136(25), 123(100).

Isomer B: EI-MS,  $m/z$  (rel. int.): 236(20), 150(10), 136(25), 123(100).

Το EI-MS του ο-νιτροτολουολίου έχει ένα θραύσμα σε  $m/z = 120$ .

Το α,α,α-τριδευτερο-ο-νιτροτολουόλιο έχει το αντίστοιχο θραύσμα σε  $m/z = 122$ . Πώς εξηγούνται αυτά τα θραύσματα;